

PEMODELAN SENYAWA *N*-3-AMINO-PROPIL-2-(4-ALIL-2-METOKSI-FENOKSI) ASETAMIDA SEBAGAI SENSOR ANION

YOGA ROYANDANA FIRDAUS

Program Studi Kimia. Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Sebelas Maret

ABSTRAK

Penelitian ini dilakukan untuk mengetahui kemampuan interaksi senyawa *N*-3-amino-propil-2-(4-alil-2-metoksi-fenoksi) asetamida dengan anion F^- , CN^- , CH_3COO^- dan $H_2PO_4^-$ sebagai sensor anion menggunakan metode komputasi kimia. Metode *density functional theory* (DFT)/aug-cc-p valence double zeta (VDZ) digunakan untuk mengetahui interaksi reseptor dengan anion. Pemodelan interaksi yang dihasilkan pada penelitian ini dapat menggambarkan bahwa interaksi reseptor dengan anion F^- dan CH_3COO^- mengakibatkan terputusnya atom hidrogen pada gugus amida disertai pembentukan ikatan kovalen dan ikatan hidrogen, sedangkan pada anion CN^- dan $H_2PO_4^-$ hanya mengakibatkan pembentukan ikatan hidrogen. Pergeseran puncak proton gugus amida diamati menggunakan metode *gauge independent atomic orbital* (GIAO) dari 4,72 ppm menjadi 15,5 ppm untuk F^- ; 10,89 ppm untuk CN^- ; 16,54 ppm untuk CH_3COO^- dan 12,27 ppm untuk $H_2PO_4^-$. Dari hasil tersebut dapat dilihat bahwa senyawa reseptor dapat digunakan sebagai sensor untuk F^- , CN^- , CH_3COO^- dan $H_2PO_4^-$.

Kata Kunci : *N*-3-amino-propil-2-(4-alil-2-metoksi-fenoksi) asetamida, Pemodelan Senyawa, 1H NMR, Sensor Anion

MODELING COMPOUND *N*-3-AMINO-PROPYL-2-(4-ALIL-2-METHOXY-PHENOXY) ACETAMIDE AS AN ANION SENSOR

YOGA ROYANDANA FIRDAUS

Department of Chemistry. Faculty of Mathematic and Natural Science
Sebelas Maret University

ABSTRACT

This study was conducted to determine the interaction ability of compound *N*-3-amino-propyl-2-(4-alil-2-methoxy-phenoxy) acetamide with F^- , CN^- , AcO^- , and $H_2PO_4^-$ as anion sensor by means of computational chemistry method. In order to understand receptor-anion interactions density functional theory (DFT)/aug-cc-p valence double zeta (VDZ) method was used. Interaction models generated in this study were able to illustrate that the interaction of receptors with anions F^- dan CH_3COO^- resulted in breaking of the hydrogen atom in amide group with the formation of covalent and hydrogen bond, whereas the anion CN^- dan $H_2PO_4^-$ resulting formed hydrogen bond. The proton signal shift in amide group was observed using the method gauge independent atomic orbital (GIAO) from 4.72 ppm to 15.5 ppm for F^- ; 10.89 ppm for CN^- ; 16.54 ppm for CH_3COO^- and 12.27 ppm for $H_2PO_4^-$. Overall, the result it can be seen that receptor compound can be used as sensor for F^- , CN^- , CH_3COO^- and $H_2PO_4^-$.

Keywords : *N*-3-amino-propyl-2-(4-alil-2-methoxy-phenoxy) acetamide, Modeling Compounds, 1H NMR, Anion Sensor